

Таблица. Коэффициенты расчетной схемы оценки (3) свойств и экспериментальные [1] и рассчитанные $\Delta_f H_{298,16, \text{газ}}^0$ нонанов, кДж/моль

Алкан	Числа параметров					$\Delta_f H_{298,16, \text{газ}}^0$		
	k ₁	k ₂	k ₃	k ₄	p ₃	Опыт	Расчет	Откл.
3,3e5	4	4	0	1	2,3094	-231,84	-231,38	-0,45
2,3m3e5	5	2	1	1	1,5629	-	-237,71	-
2,4m3e5	5	1	3	0	1,7071	-227,94	-237,03	9,09
2,3,3,4m5	6	0	2	1	0,8165	-236,10	-244,03	7,93
2,2m3e5	5	2	1	1	1,8225	-231,67	-239,71	8,04
2,2,3,3m5	6	1	0	2	0,9107	-237,11	-246,55	9,44
2,2,3,4m5	6	0	2	1	0,9082	-236,86	-244,74	7,88
2,2,4,4m5	6	1	0	2	1,1547	-241,84	-248,44	6,60
2,2m7	4	4	0	1	3,5774	-246,14	-241,19	-4,95
2m4e6	4	3	2	0	2,8284	-	-233,60	-
3m3e6	4	4	0	1	2,7321	-	-234,65	-
2m3e6	4	3	2	0	2,9142	-	-234,27	-
2,3,3m6	5	2	1	1	1,9856	-239,79	-240,98	1,19
2,2,3m6	5	2	1	1	2,1154	-241,42	-241,98	0,56
3m4e6	4	3	2	0	2,6213	-	-232,00	-
3,3,4m6	5	2	1	1	1,6927	-236,06	-238,71	2,65
3,4,5m6	5	1	3	0	1,7071	-	-237,03	-
2,2,4m6	5	2	1	1	1,9916	-243,17	-241,02	-2,15
3,3m7	4	4	0	1	3,1547	-241,58	-237,92	-3,66
3e7	3	5	1	0	4,1213	-	-231,50	-
2m8	3	5	1	0	4,7071	-	-236,04	-
3m8	3	5	1	0	4,4142	-	-233,77	-

Как видно из таблицы, схема (3) с ТИ p_3 различает изомеры нонанов и имеет более хорошие статистические характеристики, чем по (1).

ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКИЕ ПОЛИНОМЫ И СХЕМА РАСЧЕТА СВОЙСТВ МЕРКАПТАНОВ

Смирнова О.Ю.

Тверской государственный университет
170002, г.Тверь, Садовый пер., д. 35, корп.3
smolyakov@inbox.ru

На основе коэффициентов характеристических полиномов (КХП) матриц смежности A неоднородных молекулярных графов (НМГ) моле-

кул, содержащих гетероатом получена аддитивная схема расчета физико-химических свойств. Рассчитаны $\Delta_f H^0$ газообразных алкантиолов.

Полином матрицы A смежности молекулярного графа G есть выражение $P_G(\lambda) = (-1)^n \det(A - \lambda E) = \lambda^n + a_1 \lambda^{n-1} + a_2 \lambda^{n-2} + \dots + a_n$, где E – единичная матрица, a_1, a_2, \dots, a_n – коэффициенты полинома, $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ – корни полинома.

Запишем матрицу смежности A' НМГ как матрицу с элементами [1]

$$a'_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{если } i \neq j \text{ и вершины } i \text{ и } j \text{ смежны} \\ 0 - & \text{в противном случае } (i \neq j) \\ g_i, & \text{если } i = j \end{cases} \quad (1)$$

Здесь g_i – вес i -ой вершины НМГ. Вершинам графа, которые соответствуют атомам углерода в молекуле, присвоен вес $g_i = 0$. Всем остальным вершинам (гетероатомам) МГ присвоен вес g_i , равный степени σ_i соответствующей вершины. КХП матриц A' НМГ имеют ясный структурный смысл: $a_0 = 1$, $a_1 = -r_i$ – степень вершины гетероатома со знаком минус, $a_2 = m_{c-c} \cdot r_i$ – число ребер, умноженное на степень вершины гетероатома; a_4 – число пар несмежных ребер и т.д. В общем случае можно записать

$$P_{НМГ} = \dot{a}_0 \dot{x}_0 + \dot{a}_1 \dot{x}_1 + \dot{a}_2 \dot{x}_2 + \dots \quad (2)$$

Здесь $\dot{x}_0, \dot{x}_1, \dot{x}_2, \dots$ – эмпирические параметры, представленные парциальными вкладами в свойство P структурных элементов (фрагментов) гетероатомной молекулы. Параметры (2) определены МНК по опытным данным.

ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗООБРАЗОВАНИЯ ПРИ ОКИСЛЕНИИ

ЖИДКИХ СПЛАВОВ СИСТЕМЫ Bi – Ge

Аксёнова Д.С., Архипова Е.О., Белоусова Н.В.

Сибирский федеральный университет

660041, г. Красноярск, пр. Свободный, д. 79

Металлы и сплавы при их производстве в той или иной мере проходят через жидкую фазу, именно поэтому особое значение приобретают исследования взаимодействия жидких металлов с кислородом. Для того, чтобы лучше понимать механизм этого взаимодействия, необходимо знать сродство к кислороду каждого из компонентов сплава, их поверхностную активность, термодинамику процесса и т. д. Материалы на основе висмута и германия используются в ядерной физике и физике